

Электронная структура слоистых систем FeSe на подложке SrTiO₃

Слободчиков Анатолий Алексеевич

Некрасов Игорь Александрович, Павлов Никита Сергеевич, Садовский Михаил Виссарионович

Институт электрофизики УрО РАН

Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н., член-корр. РАН

stalfear@gmail.com

Открытие нового класса сверхпроводников на основе пниктидов железа дало новые перспективы исследования высокотемпературной сверхпроводимости [1]. Особенно ситуация обострилась после экспериментального наблюдения сверхпроводимости с $T_c \sim 80-100\text{K}$ в монослоях FeSe (эпитаксиальных пленках), выращенных на подложке из SrTiO₃ (и ряда аналогичных соединений) [2,3].

Для расчета электронных свойств в приближении локальной плотности (LDA) монослоя FeSe на подложке SrTiO₃ мы использовали пакет Quantum-Espresso [4]. Электронный спектр имеет типичную форму для систем на основе FeAs, а именно электронные карманы в М-точке и дырочные карманы в Г-точке зоны Бриллюэна. Однако эксперименты ARPES [5-7] убедительно показывают, что это не так. В случае монослоя FeSe на подложке SrTiO₃ только электронные листы поверхности Ферми наблюдаются вокруг М-точки, тогда как дырочные листы вокруг Г-точки (в центре зоны) попросту отсутствуют.

Обратимся теперь к результатам наших LDA расчетов электронной структуры монослоя FeSe на подложке SrTiO₃. На Рис.1 с левой стороны можно заметить появление дополнительной дырочной зоны около М-точки. Для понимания ее происхождения с правой стороны Рис.1 приведены О-2р состояния самого верхнего поверхностного слоя TiO₂ на подложке SrTiO₃. Можно сделать вывод [8], что наличие взаимодействия между монослоем FeSe и подложкой SrTiO₃ ведет к возникновению этой дополнительной зоны, образованной О-2р состояниями около уровня Ферми. Также мы наблюдаем небольшое расщепление электронных зон в М-точке. Это расщепление может иметь отношение к наблюдению двойника зоны в М-точке [6], что объясняет ее возникновение без привлечения взаимодействия с оптическими фононами в SrTiO₃.

Также интерес представляют системы, состоящие из двух и более слоев FeSe на подложке SrTiO₃. Известно [2], что в таких соединениях T_c порядка 10К либо сверхпроводимость полностью отсутствует. Их электронная структура заметно отличается от типичной структуры систем на основе FeSe, и понимание механизмов подавления сверхпроводимости может играть важную роль в изучении ВТСП на основе железа.

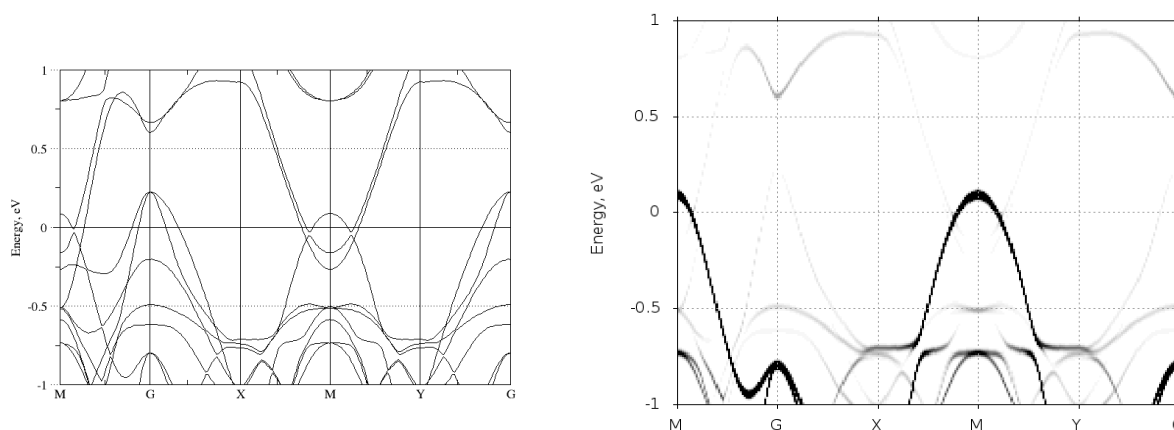


рис.1 (слева) — LDA расчет зонной структуры монослоя FeSe на подложке SrTiO₃; (справа) — LDA расчет О-2р состояний поверхностного слоя TiO₂ подложки SrTiO₃.

Список публикаций:

- [1] M.V. Sadovskii, *Usp. Fiz. Nauk*, 178, 1243 (2008).
- [2] Wang Qing-Yan et al., *Chin. Phys. Lett.*, 29, 037402 (2012).
- [3] Jian-Feng Ge et al., *Nature Materials*, 14, 285 (2015).
- [4] Giannozzi Paolo et al., *J. Phys.: Condens. Matter*, 21, 395502 (2009).
- [5] Defa Liu et al., *Nature Communications*, 3, 931 (2012).
- [6] J.J. Lee et al., *Nature*, 515, 245 (2014).
- [7] Lin Zhao et al., *Nature Communications*, 7, 10608 (2016).
- [8] I.A. Nekrasov et al., *Low Temperature Physics* 42, 891 (2016).